

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Элементы статистической термодинамики Б1.В.ДВ.7

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Седов И.А.

Рецензент(ы):

Верещагина Я.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 719516

Казань
2016

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший научный сотрудник, к.н. Седов И.А. НИЛ
Лаборатория синтетических физиологически активных веществ Химический институт им. А.М.
Бутлерова , Igor.Sedov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Осознание связей между фундаментальными законами макро- и микромира, общности и различий квантовомеханического и классического подхода к описанию окружающего мира, строгое обоснование законов термодинамики, знакомство с современными теоретическими методами физической химии.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.7 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина 'Элементы статистической термодинамики' относится к вариативной части блока дисциплин учебного плана подготовки бакалавров по направлению 'Химия' по профилю 'Физическая химия'. (курс по выбору). Студенты, приступающие к освоению дисциплины, должны владеть знаниями по следующим дисциплинам: Физическая химия, Физика, Математика.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|---|---|
| ОК-6 (общекультурные компетенции) | способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия |
| ОК-7 (общекультурные компетенции) | способностью к самоорганизации и самообразованию |
| ОПК-1 (профессиональные компетенции) | способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач |
| ОПК-3 (профессиональные компетенции) | способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности |
| ПК-3 (профессиональные компетенции) | владением системой фундаментальных химических понятий |

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные постулаты статистической термодинамики, принцип Паули и неразличимость элементарных частиц, виды статистических ансамблей и функций распределения, понятие статистической суммы и ее связь с термодинамическими функциями, расчет статистической суммы (интеграла) на основе представлений квантовой и классической механики, вклады отдельных видов энергии в статистические суммы и термодинамические функции, вириальное уравнение и другие уравнения состояния неидеальных газов, связь параметров межмолекулярных взаимодействий и параметров уравнений состояния, методы численного моделирования реальных систем.

2. должен уметь:

рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции для модельных объектов: идеальных газов, жесткого ротатора, гармонического осциллятора; неидеальных газов с определенным видом потенциала межмолекулярного взаимодействия

3. должен владеть:

теоретическим аппаратом статистической термодинамики

применять расчетные методы для предсказания термодинамических свойств веществ

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|--|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|---------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 1. | Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества. | 8 | 1-7 | 16 | 0 | 0 | устный опрос |

| N | Раздел Дисциплины/ Модуля | Семестр | Неделя семестра | Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах) | | | Текущие формы контроля |
|----|--|---------|--------------------|---|-------------------------|------------------------|-----------------------------------|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы | |
| 2. | Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газозфазных реакций. | 8 | 8-12 | 16 | 0 | 0 | письменное домашнее задание |
| 3. | Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования. | 8 | 13-17 | 10 | 0 | 0 | контрольная работа |
| | Тема . Итоговая форма контроля | 7 | | 0 | 0 | 0 | экзамен |
| | Итого | | | 42 | 0 | 0 | |

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.

лекционное занятие (16 часа(ов)):

Основные принципы статистики. Молекулярные модели макроскопических тел: идеальный газ. Термодинамика газа, макроскопическое состояние, внешние условия, отклик на внешнее возмущение, релаксация и квазистатические процессы, стационарные и равновесные состояния, энергия и энтропия, уравнение состояния, теплоемкости. Основные идеи и задачи статистики: система и подсистемы, характеристики "точки" газа, усреднение по времени и объему, термодинамический предел, энергия и давление, флуктуации. Задачи статистики.

Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газозфазных реакций.

лекционное занятие (16 часа(ов)):

Классическая статистика газа. Функция распределения, соображения о размерностях, масштабирование фазового пространства. Симметрия функции распределения: независимость от начальных условий, метод ансамблей, квазистационарные состояния, теорема Лиувилля, аддитивные интегралы движения, микроканоническое распределение, исключение импульса и момента, вид функции распределения, проблемы с определением энтропии. Квантовая статистика газа. Соотношения неопределенностей, чистые и смешанные состояния, матрица плотности, теорема Лиувилля, микроканоническое распределение, вид функции распределения, статистический вес макроскопического состояния. Квазиклассический переход, введение постоянной Планка в классическую статистику, квантование фазового пространства, статистические веса макросостояний в классической статистике

Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.

лекционное занятие (10 часа(ов)):

. Термодинамические величины, Энтропия в квантовой и классической статистике, физический смысл энтропии, различные полезные формулы, закон возрастания энтропии, теорема Нернста. Температура и давление. Термическое и механическое равновесия. Основное термодинамическое тождество. Термодинамические неравенства: устойчивость равновесия, стабильные и метастабильные состояния. Термодинамические функции: энергия, энтальпия, свободная энергия и термодинамический потенциал. Зависимость термодинамических функций от числа частиц. Химический потенциал. 3. Распределение Гиббса. Каноническое распределение Гиббса, распределение Максвелла, свободная энергия в распределении Гиббса, большое каноническое распределение Гиббса с переменным числом частиц. Упрощения для идеального газа: принцип равномерного распределения, распределения Больцмана, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна, свободная энергия и уравнение состояния идеального газа. Вычисление термодинамических функций одно-, двух- и многоатомного газов, термодинамические таблицы, стандартные состояния.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----------|--|----------------|------------------------|--|-------------------------------|--|
| 1. | Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества. | 8 | 1-7 | подготовка к устному опросу | 11 | устный опрос |

| N | Раздел Дисциплины | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|--|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 2. | Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций. | 8 | 8-12 | подготовка домашнего задания | 11 | домашнее задание |
| 3. | Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования. | 8 | 13-17 | подготовка к контрольной работе | 8 | контрольная работа |
| | Итого | | | | 30 | |

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекции, мультимедийные презентации, практические занятия, в том числе с использованием компьютерных программ для решения задач.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Основы статистической термодинамики. Вывод основных видов функций распределения. Связь статистической суммы с макроскопическими свойствами вещества.

устный опрос , примерные вопросы:

Микроканонический ансамбль. Эргодическая гипотеза. Понятие энтропии и второе начало термодинамики. Канонический ансамбль и вывод распределения Больцмана. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями. Статистический интеграл.

Тема 2. Интерпретация свойств идеальных объектов на основе статистической термодинамики. Расчет статистических сумм и термодинамических функций для различных газов, констант равновесия и энтальпий газофазных реакций.

домашнее задание , примерные вопросы:

Большой канонический ансамбль, вывод функции распределения. Бозоны и статистика Бозе-Эйнштейна. Фермионы и статистика Ферми-Дирака. Колебательная статистическая сумма и характеристическая колебательная температура. Вращательная сумма и характеристическая вращательная температура. Поступательная сумма, статистический интеграл для одноатомного идеального газа.

Тема 3. Применение статистической термодинамики к реальным системам. Методы численного моделирования.

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе: Ядерная и электронная статистические суммы. Молекулы орто- и параводорода. Теплоемкость идеального кристалла и температура Дебая. Электронный газ, сверхпроводимость и сверхтекучесть. Неидеальные системы, конфигурационный интеграл. Модель решеточного газа. Потенциалы межмолекулярных взаимодействий. Вывод уравнений состояния неидеальных газов. Применение статистической термодинамики к описанию жидкостей. Методы численного моделирования.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Примеры билетов к зачету:

Билет 1

1. Микроканонический ансамбль.
2. Статистическая сумма и ее связь с термодинамическими функциями.
3. Вращательная сумма и характеристическая вращательная температура.

Билет 2

1. Эргодическая гипотеза.
2. Статистический интеграл.
3. Бозоны и статистика Бозе-Эйнштейна.

Билет 3

1. Понятие энтропии и второе начало термодинамики.
2. Большой канонический ансамбль, вывод функции распределения.
3. Фермионы и статистика Ферми-Дирака.

Билет 4

1. Канонический ансамбль и вывод распределения Больцмана.
2. Колебательная статистическая сумма и характеристическая колебательная температура.
3. Поступательная сумма, статистический интеграл для одноатомного идеального газа.

7.1. Основная литература:

1. Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям 'Химическая технология', 'Биотехнология' и 'Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии' / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
2. Афанасьев Б.Н. Акулова Ю.П. Физическая химия. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург.: Лань, 2012. - 416 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312
3. Еремин, В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину 'Химия', по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. ? Долгопрудный: Интеллект, 2012. ? 847 с.:
4. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. ? 101 с.

Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64336

7.2. Дополнительная литература:

1. Физическая химия : Учеб. для вузов: В 2кн. Кн.1. Строение вещества. Термодинамика / ; Краснов К.С., Воробьев Н.К., Годнев И.Н.; Под ред. К.С.Краснова .? 3-е изд., испр. ? М. : Высшая школа, 2001 .? 512с.

2. Горшков И. Основы физической химии.- Бином.Лаборатория знаний, 2011. - 408 с.
3. Пурмаль А.П. А, Б, В? химической кинетики. М.: ИКЦ 'Академкнига'. 2004.
4. Дамаскин, Б.Б. Электрохимия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий, Г.А. Цирилина. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. - 671 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=58166

7.3. Интернет-ресурсы:

Cambridgesoft ChemBioOffice - <http://www.cambridgesoft.com/software/ChemBioOffice/>
TINKER molecular modeling software - <http://dasher.wustl.edu/tinker/>
книги - <http://elibrary.ru>
книги - <http://gen.lib.rus.ec>
Портал - http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_mechanics

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Элементы статистической термодинамики" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Проектор, персональные компьютеры или ноутбуки для решения задач.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Физическая химия .

Автор(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Верещагина Я.А. _____

"__" _____ 201__ г.